

Desempenho do método de Newton truncado em otimização não linear sem restrições

Ana I.P.N. Pereira

Departamento de Matemática, Instituto Politécnico de Bragança, 5300 Bragança
email: apereira@ipb.pt

Edite M.G.P. Fernandes

Departamento de Produção e Sistemas, Universidade do Minho, 4710 Braga
email: emgpf@dps.uminho.pt

Abstract

Newton's method for unconstrained nonlinear optimization can be a demanding iterative process. Combining Krylov iterative methods with different termination criteria for the inexact solving of the Newton system, a linear or a curvilinear search technique and monotone and nonmonotone globalization criteria, we manage to define a set of truncated Newton algorithms. Computational experiments were carried out in order to evaluate the performance of the defined algorithms.

Resumo

O método de Newton para a resolução de um problema de otimização não linear sem restrições pode originar um processo iterativo exigente. Combinando métodos iterativos de Krylov com diferentes critérios de terminação para a resolução inexacta do sistema Newton, uma técnica de procura que pode ser linear ou curvilínea e critérios de globalização monótonos e não monótonos, conseguimos definir um conjunto de algoritmos do método de Newton truncado. Foram realizadas experiências computacionais para avaliar o desempenho dos diferentes algoritmos.

Title: Performance of the truncated Newton method in unconstrained nonlinear optimization

Keywords: Unconstrained optimization, truncated Newton's method, nonmonotone stabilization technique.

1 Introdução

Um problema de otimização de uma função real de n variáveis reais sem restrições pode ser formulado como

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad (1)$$

em que $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ se supõe não linear nas variáveis e duas vezes continuamente diferenciável.

Um ponto de estacionaridade é um ponto que anula o vector gradiente da função f . Se num ponto de estacionaridade a matriz Hessiana for definida positiva então o ponto é um minimizante local. Denotaremos por $g(x)$ o vector gradiente da função f , em x , e por $H(x)$ a matriz Hessiana, ou das segundas derivadas, de f em x .

O método de Newton é um processo iterativo que gera uma sucessão de aproximações $\{x_k\}$ a um ponto de estacionaridade de f usando, em cada iteração k , uma aproximação quadrática da função f em torno de um ponto x_k . Mais precisamente, x_{k+1} é o resultado das seguintes operações:

- obter o vector p_k , solução do sistema

$$H(x_k)p = -g(x_k), \quad (2)$$

- afectar $x_{k+1} = x_k + p_k$.

Denotaremos o sistema linear em (2) por sistema Newton e designaremos a sua solução, quando única, por direcção Newton.

A popularidade do método de Newton deve-se à sua rápida convergência, à fácil codificação quando as derivadas são simples ou quando se recorre a ferramentas de diferenciação automática de funções e ao facto de ser invariante quando se aplica algum esquema de escalonamento das variáveis [2], [3], [14], [18], [19], [20] e [24].

Alguns aspectos menos positivos estão relacionados com o facto da convergência ser local e com a necessidade de resolver o sistema (2) em cada iteração. A primeira limitação é facilmente ultrapassada com a introdução de uma técnica de globalização no algoritmo. Quanto ao sistema Newton, poderá não se justificar a sua resolução exacta quando a aproximação x_k se encontra afastada do ponto de estacionaridade ou quando o número de variáveis é elevado. Nestes casos, pode optar-se pela resolução inexacta do sistema recorrendo a métodos iterativos.

Este artigo tem como objectivo fazer um estudo comparativo do desempenho de algumas variantes do método de Newton que surgem da combinação de critérios de globalização, estratégias de procura de aproximações à solução e métodos iterativos para a resolução inexacta do sistema Newton.

O artigo está estruturado do seguinte modo. Na Secção 2 são apresentadas duas técnicas de procura unidimensional, uma monótona e a outra não monótona, para a globalização dos algoritmos. A apresentação é feita separadamente para as estratégias de procura linear e procura curvilínea de aproximações à solução. Na Secção 3 descrevem-se quatro métodos iterativos, baseados em espaços de Krylov, para a resolução inexacta do sistema Newton. Os resultados obtidos da implementação das diversas variantes do método de Newton são apresentados na Secção 4 e a Secção 5 contém as conclusões.

1 Técnicas de globalização

Seleccionámos a técnica de procura unidimensional para a globalização dos algoritmos. Dada uma direcção de procura, este tipo de técnica calcula um escalar, λ , que representa o comprimento do passo a efectuar ao longo da direcção, de modo a que o valor da função objectivo diminua de uma forma desejada.

Um critério de procura monótono exige uma redução significativa do valor da função objectivo em todas as iterações para garantir convergência para um minimizante. Por outro lado, ao forçar este comportamento, seleccionando quando necessário valores de λ

menores que a unidade, a convergência pode abrandar especialmente na presença de vales profundos e estreitos [2] e [9]. Assim, parece mais vantajoso implementar um critério de procura que permita um aumento do valor da função objectivo em certas iterações, conservando a convergência global. Este tipo de critério é denominado por não monótono [9].

As aproximações à solução do problema (1) podem ser obtidas com base numa única direcção de procura ou através de uma combinação de duas direcções. No primeiro caso, a procura diz-se linear e no segundo, curvilínea.

2.1 Procura linear

O método de Newton com procura linear consiste em definir uma sucessão de aproximações $\{x_k\}$ através da fórmula recursiva $x_{k+1} = x_k + \lambda_k p_k$, onde p_k é a solução exacta ou aproximada do sistema Newton e λ_k é um escalar positivo escolhido de forma a satisfazer um conjunto de condições. Estas condições devem proporcionar a convergência global do método ao mesmo tempo que não devem impedir a escolha de $\lambda_k = 1$ na proximidade de um minimizante local onde a matriz Hessiana é definida positiva. Deste modo, o método assume assintoticamente as boas propriedades locais do método de Newton.

Apresentam-se de seguida dois grupos de condições. As condições de Wolfe e as de Goldstein [20], que definem um critério monótono, e as condições de Grippo, Lampariello e Lucidi [10] que caracterizam um critério não monótono com estabilização do passo.

2.1.1 Critério monótono

As condições seguintes, conhecidas por condições de Wolfe, asseguram um decréscimo monótono dos valores da função objectivo ao longo do processo iterativo e são suficientes para assegurar a convergência global do método. Assim, o escalar positivo λ_k deve satisfazer:

$$f(x_k + \lambda_k p_k) \leq f(x_k) + \gamma \lambda_k g(x_k)^T p_k, \quad \gamma \in \left]0, \frac{1}{2}\right[\quad (3)$$

$$g(x_k + \lambda_k p_k)^T p_k \geq \eta g(x_k)^T p_k, \quad \eta \in \left]\frac{1}{2}, 1\right[. \quad (4)$$

A condição (3), conhecida por condição de Armijo, obriga a que $f(x_{k+1})$ seja significativamente menor do que $f(x_k)$. A condição (4), conhecida por condição de curvatura, evita que λ_k seja demasiado pequeno. Se p_k for uma direcção descendente então a existência de λ_k está assegurada e a convergência global do método de Newton com procura linear está garantida [2, pp. 120].

Resultados análogos de convergência global também podem ser obtidos se a condição (4) for substituída por

$$f(x_k + \lambda_k p_k) \geq f(x_k) + \eta \lambda_k g(x_k)^T p_k, \quad \eta \in \left]\frac{1}{2}, 1\right[\quad (5)$$

(veja-se [20, pp. 490]). As condições (3) e (5) são conhecidas por condições de Goldstein e têm a vantagem de não necessitar do cálculo do gradiente $g(x_k + \lambda_k p_k)$.

2.1.2 Critério não monótono com estabilização do passo

O critério não monótono com estabilização do passo não força uma redução dos valores da função objectivo em todas as iterações. De facto, o passo pode ser automaticamente aceite, sem avaliar a função objectivo no novo iterando, se o teste de estabilização definido por $\|p_k\| \leq \Delta_k$ for satisfeito, para alguma sucessão $\{\Delta_k\}$ que converge para zero. Este teste tem como objectivo verificar se os iterandos estão a convergir ou se a convergência tem que ser forçada por um procedimento de procura não monótono [10].

Este procedimento usa na condição de Armijo um valor de referência F_j , em vez de $f(x_k)$,

$$f(x_k + \lambda_k p_k) \leq F_j + \gamma \lambda_k g(x_k)^T p_k \quad (6)$$

em que F_j é o maior valor que a função atinge num número pré-determinado de iterações anteriores. A condição (6) pode ser vista como uma generalização da condição (3), no sentido de que permite o aumento do valor da função sem afectar as propriedades de convergência [9, pp. 709].

2.2 Procura curvilínea

A direcção Newton p_k pode não ser uma direcção descendente e, por isso, pode não existir λ_k que satisfaça qualquer das condições apresentadas anteriormente. Para obviar esta dificuldade, Goldfard [5] e McCormick [16] propuseram uma variante do método de Newton que define x_{k+1} não só à custa da direcção Newton p_k mas também à custa de uma direcção de curvatura negativa s_k , quando detectada. Moré e Sorensen [17] propõem duas técnicas para o cálculo da direcção s_k .

O método de Newton com procura curvilínea consiste em definir $x_{k+1} = x_k + \lambda_k^2 p_k + \lambda_k s_k$, com λ_k um escalar positivo a satisfazer um conjunto de condições, das quais destacamos o critério monótono proposto por Moré e Sorensen [17] e o critério não monótono com estabilização do passo proposto por Ferris, Lucidi e Roma [4].

2.2.1 Critério monótono

As condições seguintes são conhecidas por condições de Goldstein modificadas de segunda ordem e envolvem as duas direcções previamente calculadas p_k e s_k

$$f(x_k + \lambda_k^2 p_k + \lambda_k s_k) \leq f(x_k) + \gamma \lambda_k^2 \left[g(x_k)^T p_k + \frac{1}{2} s_k^T H(x_k) s_k \right], \quad \gamma \in \left] 0, \frac{1}{2} \right[\quad (7)$$

$$f(x_k + \lambda_k^2 p_k + \lambda_k s_k) \geq f(x_k) + \eta \lambda_k^2 \left[g(x_k)^T p_k + \frac{1}{2} s_k^T H(x_k) s_k \right], \quad \eta \in \left] \frac{1}{2}, 1 \right[. \quad (8)$$

Quando o par de direcções (p_k, s_k) verifica certas propriedades, estas condições garantem a convergência para um ponto de estacionaridade de f onde a Hessiana é semidefinida positiva [17, pp. 15].

2.2.2 Critério não monótono com estabilização do passo

Na sequência do que foi referido em 2.1.2, a condição generalizada que corresponde a (7) para a aceitação de λ_k é neste caso dada por

$$f(x_k + \lambda_k^2 p_k + \lambda_k s_k) \leq F_j + \gamma \lambda_k^2 \left[g(x_k)^T p_k + \frac{1}{2} s_k^T H(x_k) s_k \right],$$

em que F_j é o valor de referência. Na procura curvilínea, o teste de estabilização baseia-se na condição $\|p_k\| + \|s_k\| \leq \Delta_k$. As propriedades de convergência de um algoritmo baseado nas condições enunciadas são apresentadas em Ferris, Lucidi e Roma [4, pp. 124].

2 Métodos iterativos de Krylov

A utilização de um método iterativo para calcular uma aproximação à direcção Newton origina o método de Newton inexacto. A condição de paragem do método iterativo deve basear-se no tamanho do vector resíduo, dado por

$$r = H_k p + g_k$$

em que $H_k = H(x_k)$, $g_k = g(x_k)$ e p é a direcção Newton efectivamente calculada. Controlando o vector resíduo, é possível estabelecer um equilíbrio entre a exactidão com que o sistema Newton é resolvido e o número de operações realizadas em cada iteração. Seleccionámos para este artigo quatro métodos iterativos baseados em espaços de Krylov.

3.1 Método dos gradientes conjugados

Um dos métodos mais conhecidos para resolver sistemas lineares é o método dos gradientes conjugados (veja-se Golub e Van Loan [6], Greenbaum [8], Hackbusch [11] e Kelley [13]).

Se p_0 for uma aproximação inicial à solução do sistema Newton, a sucessão de aproximações é obtida através da fórmula recursiva $p_{j+1} = p_j + a_j d_j$, onde o coeficiente a_j é determinado por forma a minimizar a norma $-H_k$ do erro ($\bar{r}_{j+1} = -H_k^{-1} g_k - p_{j+1}$)

$$a_j = \frac{\langle r_j, d_j \rangle}{\langle d_j, H_k d_j \rangle},$$

e a direcção d_{j+1} é actualizada por $d_{j+1} = r_{j+1} + b_j d_j$, sendo b_j um coeficiente que se obtém resolvendo a equação $\langle d_{j+1}, d_j \rangle_{H_k} = 0$, ou seja

$$b_j = -\frac{\langle r_{j+1}, H_k d_j \rangle}{\langle d_j, H_k d_j \rangle}.$$

Este método requer poucos recursos informáticos. Além do armazenamento da matriz H_k , que é constante ao longo do processo iterativo, exige apenas o cálculo e o armazenamento de quatro vectores em cada iteração. O método dos gradientes conjugados é eficiente se a matriz for simétrica e definida positiva. Quando a matriz H_k é indefinida, o método pode falhar. No entanto, existem variantes do método dos gradientes conjugados que incorporam esquemas de segurança para identificar matrizes indefinidas (veja-se Dembo e Steihaug [1] e Gould, Lucidi, Roma e Toint [7]).

3.2 Processo de Lanczos

O processo de Lanczos não exige que a matriz dos coeficientes do sistema seja definida positiva, sendo pois um bom ponto de partida para o desenvolvimento de métodos iterativos para a resolução de sistemas indefinidos. Com base numa matriz simétrica, o processo de Lanczos reduz a matriz dos coeficientes do sistema a uma matriz tridiagonal ou pentagonal (Greenbaum [8] e Paige e Saunders [21]).

Consideremos uma aproximação à solução do sistema Newton (2) na forma $p_j = V_j z_j$ onde $V_j = [v_1 v_2 \dots v_j]$ é uma matriz ortogonal de dimensão $n \times j$. Os vectores v_i , $i = 1, \dots, j$, são obtidos pelo processo de Lanczos através da equação

$$\beta_{i+1} v_{i+1} = H_k v_i - \alpha_i v_i - \beta_i v_{i-1}, \text{ com } i = 1, 2, \dots$$

em que $v_0 = 0$, $v_1 = -\frac{g_k}{\|g_k\|}$, $\beta_1 = \|g_k\|$, $\alpha_i = v_i^T H_k v_i$ e $\beta_{i+1} \geq 0$ deve ser escolhido de modo a que $\|v_{i+1}\| = 1$.

Do problema $\min_{z \in \mathbb{R}^j} \|r_j\|_B^2$, onde $r_j = g_k + H_k V_j z_j$ é o vector resíduo da aproximação p_j , conclui-se que um ponto de estacionaridade z_j satisfaz o seguinte sistema linear $V_j^T H_k B H_k V_j z_j = -V_j^T H_k B g_k$ que é equivalente a (2).

Dependendo da escolha da matriz B , assim se obtêm sistemas equivalentes ao sistema inicial. Se $B = H_k^-$, onde H_k^- representa a inversa generalizada da matriz H_k , obtém-se o sistema tridiagonal

$$T_j z_j = \beta_1 e_1, \text{ com } p_j = V_j z_j, \quad (9)$$

onde T_j é uma matriz simétrica e tridiagonal de dimensão j , com $T_{i,i} = \alpha_i$, $i = 1, \dots, j$ e $T_{i+1,i} = T_{i,i+1} = \beta_{i+1}$, $i = 1, \dots, j-1$. O vector e_1 designa o primeiro vector da base canónica. Este sistema linear tem solução única se e só se T_j for não singular. Quando a matriz B é a identidade, obtém-se o sistema pentagonal

$$[T_j^2 + \beta_{j+1}^2 e_j e_j^T] z_j = T_j \beta_1 e_1, \text{ com } p_j = V_j z_j. \quad (10)$$

Neste caso, o número de condição da matriz do sistema (10) poderá ser maior do que o número de condição da matriz do sistema inicial (2), que pode ser um inconveniente quando H_k for mal condicionada [21, pp. 619].

3.3 Método dos gradientes conjugados segundo Paige e Saunders

Esta versão do método dos gradientes conjugados baseia-se no processo de Lanczos e foi proposta por Paige e Saunders [21] no âmbito da resolução de um sistema linear simétrico e definido positivo.

Se a matriz H_k for definida positiva, a matriz T_j de (9) também o é, pois os seus valores próprios estão entre o maior e o menor valor próprio da matriz H_k [21]. Quando a matriz T_j é definida positiva, o sistema (9) pode ser resolvido pela decomposição Cholesky, $T_j = L_j D_j L_j^T$, em que L_j é uma matriz bidiagonal inferior com elementos unitários na diagonal principal e D_j uma matriz diagonal com elementos positivos.

O método dos gradientes conjugados segundo Paige e Saunders é baseado na resolução do sistema (9) através da decomposição Cholesky da matriz T_j . Assim, a sucessão de

aproximações à direcção Newton é obtida na forma $p_j = V_j z_j$ onde o vector z_j é calculado através do seguinte sistema

$$L_j D_j L_j^T z_j = \beta_1 e_1.$$

A actualização das matrizes factorizadas é simples uma vez que L_j e D_j são respectivamente as submatrizes principais de L_{j+1} e D_{j+1} . O cálculo dos elementos l_{j+1} , da posição $(j+1, j)$ da matriz L_{j+1} , e d_{j+1} da matriz D_{j+1} , faz-se através das igualdades

$$l_{j+1} = \frac{\beta_{j+1}}{d_j} \text{ e } d_{j+1} = \alpha_{j+1} - \beta_{j+1} l_{j+1}.$$

Esta versão é matematicamente equivalente ao método dos gradientes conjugados, embora a abordagem ao nível computacional seja ligeiramente diferente. Como facilmente se constata, esta versão requer que a matriz H_k seja definida positiva para que a decomposição Cholesky exista e assim garantir estabilidade numérica do processo iterativo [21, pp. 621].

3.4 Método symmlq

Esta apresentação do método symmlq (de *symmetric LQ decomposition*) tem como base o trabalho de Paige e Saunders [21].

Quando a matriz do sistema é indefinida, pode usar-se o método symmlq para resolver o sistema (2). Este método é baseado na resolução do sistema (9) através da decomposição LQ da matriz T_j . Seja $T_j = \bar{L}_j Q_j$ a decomposição ortogonal da matriz T_j , onde \bar{L}_j é uma matriz triangular inferior composta por três diagonais e Q_j uma matriz ortogonal.

Substituindo T_j pela decomposição ortogonal, obtém-se o sistema

$$\bar{L}_j Q_j z_j = \beta_1 e_1 \text{ com } p_j = V_j z_j. \quad (11)$$

Também neste caso, a actualização da matriz \bar{L}_j se faz com relativa facilidade. A submatriz principal de ordem j de \bar{L}_{j+1} é uma matriz L_j que difere de \bar{L}_j no elemento \bar{l}_j da posição (j, j) . A relação entre \bar{l}_j e o correspondente elemento de L_j é $\bar{l}_j = \sqrt{\bar{l}_j^2 + \beta_{j+1}^2}$.

Tal como o método dos gradientes conjugados, o método symmlq minimiza a norma $-l_2$ do erro mas num espaço diferente de Krylov [8]. Além disso, quando a matriz do sistema é definida positiva o método symmlq gera a mesma solução que o método dos gradientes conjugados.

3.5 Método minres

O método minres (de *minimum residual*) [8] e [21] pode ser aplicado a sistemas simétricos indefinidos e é baseado na resolução do sistema (10) e na decomposição $\bar{L}_j Q_j$ de T_j .

A matriz dos coeficientes do sistema (10) é pentagonal e pelo menos semidefinida positiva. Utilizando a decomposição $\bar{L}_j Q_j$ de T_j , obtém-se

$$T_j^2 + \beta_{j+1}^2 e_j e_j^T = \bar{L}_j \bar{L}_j^T + (\beta_{j+1} e_j) (\beta_{j+1} e_j)^T = L_j L_j^T,$$

com $\bar{L}_j = L_j D_j$, onde $D_j = \text{diag}(1, \dots, 1, c_j)$ e $c_j = \bar{\iota}_j / \iota_j$. Assim, o sistema (10) é equivalente a

$$L_j L_j^T z_j = \beta_1 \bar{L}_j Q_j e_1 \text{ com } p_j = V_j z_j.$$

3.6 Critérios de terminação

Não parece razoável terminar os métodos iterativos acima descritos para a resolução do sistema Newton, apenas quando a solução exacta for encontrada. Em vez disso, deve usar-se um critério de terminação. Este critério inclui condições que, sendo verificadas, garantem que a aproximação é adequada face ao progresso do algoritmo.

Quando se introduz um critério de terminação para parar o processo iterativo antes de atingir a solução exacta do sistema Newton, diz-se que o processo foi truncado e o método de Newton resultante é conhecido por método de Newton truncado (NT). A aproximação à solução passa a ser denotada por p_k , onde k designa o índice da iteração do método de Newton. Neste sentido, p_k é a direcção utilizada para determinar uma nova aproximação ao ponto de estacionaridade da função f .

Apresentam-se de seguida os três critérios implementados neste trabalho.

Critério de Terminação 1

Um dos critérios de terminação limita os resíduos, em termos relativos, por uma constante positiva previamente fixada, ξ , ou seja, as iterações terminam quando

$$\frac{\|g_k + H_k p_j\|}{\|g_k\|} \leq \xi ,$$

sendo p_j uma aproximação à direcção Newton. Se ξ for suficientemente pequeno, a aproximação p_j está muito próxima da direcção Newton e a exactidão com que o sistema Newton é resolvido mantém-se constante ao longo do processo iterativo.

Critério de Terminação 2

São bem conhecidas as propriedades de convergência do método de Newton na vizinhança da solução. Longe de um ponto de estacionaridade parece não haver justificação para calcular a solução exacta do sistema Newton. Assim, parece existir uma relação directa entre o trabalho necessário para calcular a direcção de procura e a proximidade a um ponto de estacionaridade. Um critério que tem em consideração esta relação, baseia-se na condição

$$\frac{\|r_j\|}{\|g_k\|} \leq \min \left\{ \frac{1}{k}, \|g_k\|^t \right\} ,$$

para algum $0 < t \leq 1$ [1], para a paragem do processo iterativo. Desta escolha resulta que na proximidade de um ponto de estacionaridade a exactidão com que o sistema é resolvido é maior.

Critério de Terminação 3

Uma aproximação à direcção Newton também pode ser avaliada através da grandeza do vector resíduo. Lucidi e Roma [15] propõem a seguinte condição como critério de terminação no cálculo de uma aproximação à solução do sistema Newton

$$\|r_j\| \leq \tau \min \left\{ 1, \|g_k\| \max \left\{ \frac{1}{k+1}, \frac{1}{e^{\frac{k}{\tau n}}} \right\} \right\} ,$$

onde $\tau > 0$. Este critério tem características, em parte, semelhantes ao segundo. O resíduo mantém-se constante longe de um ponto de estacionaridade da função e tende para zero à medida que se avança no processo iterativo e $\|g_k\| \rightarrow 0$.

3 Estudo computacional

Os resultados apresentados nesta secção foram obtidos com base num número limitado de testes e fornecem algumas indicações sobre o desempenho das diversas variantes apresentadas.

O computador utilizado foi um *Pentium II*, *Celeron* a *466Mhz* com *64M RAM*. A linguagem de programação foi o *Fortran 90* sobre o sistema operativo *MS-DOS*.

Foi usado um conjunto de dez problemas de optimização com e sem restrições nas variáveis, de pequena dimensão, que inclui problemas bem conhecidos e de difícil resolução. Os problemas com restrições nas variáveis foram transformados em problemas sem restrições através da função de penalidade l_2 em que o parâmetro de penalidade foi mantido constante ao longo do processo iterativo. Os problemas sem restrições (*S201*, *S256* e *S257*) foram retirados de Schittkowski [23] e os com restrições foram retirados de Hock e Schittkowski [12] (*HS006* com parâmetro de penalidade 1 e 10, *HS007* com parâmetro de penalidade 1 e 100 e *HS027* com parâmetro de penalidade 1) e de Grippo, Lampariello e Lucidi [10] (função Maratos com o parâmetro de penalidade 1 e 100).

As experiências computacionais realizadas tinham como objectivo identificar:

- uma técnica eficiente e robusta para calcular uma aproximação à direcção Newton através da combinação de um métodos iterativo, para a resolução do sistema Newton, com um dos critérios de terminação descritos na Subsecção 3.6;
- um critério de procura unidimensional, monótono ou não monótono, para a globalização do algoritmo;
- uma estratégia de procura, linear ou curvilínea, para gerar as aproximações x_k à solução do problema.

Para a resolução inexacta do sistema Newton foram usados os seguintes métodos: gradientes conjugados (gc), gradientes conjugados baseado no processo de Lanczos (gc-PS), symmlq e minres.

Optou-se por apresentar um resumo dos resultados de modo a tornar mais fácil a sua análise e interpretação. As tabelas completas podem ser consultadas em Pereira [22]. Considerámos que um problema é resolvido quando se obtém uma aproximação a um ponto de estacionaridade em que $\|g(x_k)\| \leq 10^{-6}$, em menos de 100 iterações.

A ordem entre as comparações efectuadas é a seguinte: comparação entre os métodos iterativos para a resolução do sistema Newton, comparação entre os critérios de procura unidimensional monótono e não monótono com estabilização do passo e comparação entre a procura linear e a curvilínea.

4.1 Comparação entre os métodos iterativos

Para identificar o método iterativo e o critério de terminação mais adequados à resolução inexacta do sistema Newton, considerámos os seguintes valores:

- Critério de Terminação 1 (C-1): $\xi = 10^{-7}$;
- Critério de Terminação 2 (C-2): $t = 1$ (indicado por Dembo e Steihaug [1]);
- Critério de Terminação 3 (C-3): $\tau = 10^{-1}$ (indicado por Lucidi e Roma [15]).

Cada método iterativo para a resolução do sistema Newton foi testado com os três critérios de terminação e com as estratégias de globalização monótona e não monótona com estabilização do passo. A Tabela 1 apresenta, de um total de vinte testes, o número de casos bem sucedidos. O número vinte surge da combinação dos dez problemas com as duas estratégias de globalização.

| | <i>gc</i> | <i>gc-PS</i> | <i>symmlq</i> | <i>minres</i> |
|-----|-----------|--------------|---------------|---------------|
| C-1 | 20 | 20 | 20 | 20 |
| C-2 | 13 | 13 | 13 | 16 |
| C-3 | 20 | 20 | 20 | 20 |

Tabela 1: Métodos iterativos de Krylov (número de casos resolvidos).

Pode concluir-se que, em termos de robustez, os melhores critérios de terminação a usar nos métodos iterativos são o C-1 e o C-3.

Para analisar a eficiência, considerou-se o número de iterações externas (iteraões que o método de Newton truncado necessita para atingir uma aproximação a um ponto de estacionaridade com uma certa precisão) e o número total de iterações internas (iteraões necessárias para a resolução do sistema Newton por um método iterativo com um determinado critério de terminação). Os resultados acumulados do número de iterações externas (NºExt.) e internas (NºInt.), na resolução comum de seis problemas, são dados na Tabela 2.

| | <i>gc</i> | | <i>gc-PS</i> | | <i>symmlq</i> | | <i>minres</i> | |
|-----|-----------|--------|--------------|--------|---------------|--------|---------------|--------|
| | NºExt. | NºInt. | NºExt. | NºInt. | NºExt. | NºInt. | NºExt. | NºInt. |
| C-1 | 124 | 370 | 124 | 368 | 124 | 378 | 124 | 374 |
| C-2 | 114 | 248 | 114 | 248 | 116 | 259 | 121 | 263 |
| C-3 | 111 | 314 | 111 | 314 | 111 | 319 | 111 | 314 |

Tabela 2: Métodos iterativos de Krylov (número de iterações).

Dos testes efectuados, verifica-se que com o Critério de Terminação 3 atinge-se a solução em menos iterações externas. O Critério de Terminação 2 é o que exige menos iterações internas. No entanto, face aos resultados da Tabela 1, podemos concluir que o critério C-3 é o mais adequado para a resolução inexacta do sistema Newton.

4.2 Critério monótono *versus* critério não monótono com estabilização

Nas estratégias de globalização do algoritmo, definidas na Secção 2, considerámos os seguintes parâmetros $\eta = 0.9$ e $\gamma = 10^{-4}$. Também usámos na estratégia não monótona com estabilização do passo os valores sugeridos por Ferris, Lucidi e Roma [4].

Veamos agora de que maneira a escolha da técnica de globalização influencia a eficiência e a robustez dos métodos NT. Relativamente à robustez, apenas os métodos *gc*, *gc-PS* e *symmlq*, quando combinados com o Critério de Terminação 2, possuem diferenças no número total de problemas resolvidos, que se traduzem apenas num caso. Na Tabela 3, são apresentados os resultados acumulados relativos ao número de iterações externas e cálculos da função (Nº F.), com base em seis problemas que foram resolvidos simultaneamente por todas as variantes.

| | <i>gc</i> | | <i>gc-PS</i> | | <i>symmlq</i> | | <i>minres</i> | |
|-----|-----------|------|--------------|------|---------------|------|---------------|------|
| | NºExt. | NºF. | NºExt. | NºF. | NºExt. | NºF. | NºExt. | NºF. |
| C-1 | 62 | 372 | 62 | 372 | 62 | 372 | 62 | 372 |
| C-2 | 56 | 171 | 56 | 171 | 58 | 196 | 60 | 190 |
| C-3 | 55 | 191 | 55 | 199 | 55 | 197 | 56 | 198 |

Tabela 3: Métodos iterativos de Krylov (critério monótono).

Em termos do número de chamadas à função, para o cálculo do comprimento do passo, as melhores variantes do método NT são aquelas que utilizam o Critério de Terminação 2 e os métodos *gc* e *gc-PS*. A Tabela 4 contém o mesmo tipo de resultados, mas agora obtidos com o critério não monótono com estabilização.

| | <i>gc</i> | | <i>gc-PS</i> | | <i>symmlq</i> | | <i>minres</i> | |
|-----|-----------|------|--------------|------|---------------|------|---------------|------|
| | NºExt. | NºF. | NºExt. | NºF. | NºExt. | NºF. | NºExt. | NºF. |
| C-1 | 62 | 9 | 62 | 9 | 62 | 9 | 62 | 9 |
| C-2 | 58 | 9 | 56 | 8 | 58 | 8 | 61 | 8 |
| C-3 | 56 | 9 | 56 | 9 | 56 | 9 | 55 | 9 |

Tabela 4: Métodos iterativos de Krylov (critério não monótono com estabilização do passo).

A variação no número de chamadas à função é pouco significativa. Comparando os resultados das Tabelas 3 e 4, verifica-se que o critério não monótono reduz de uma forma significativa o número de chamadas à função sem contudo aumentar o número de iterações externas.

4.3 Procura linear *versus* procura curvilínea

Como referido na Subsecção 2.2, o método NT baseado numa procura curvilínea recorre ao cálculo de duas direcções: a de Newton e uma de curvatura negativa. Quando existe, a direcção de curvatura negativa pode ser calculada com base na matriz T_j do processo de Lanczos [15]. Neste contexto, apenas foram utilizados o método dos gradientes conjugados

segundo Paige e Saunders, o *symmlq* e o *minres*. A Tabela 5 apresenta o número de casos resolvidos por cada um dos métodos.

| | <i>gc-PS</i> | <i>symmlq</i> | <i>minres</i> |
|-----|--------------|---------------|---------------|
| C-1 | 20 | 20 | 20 |
| C-2 | 19 | 18 | 19 |
| C-3 | 20 | 20 | 20 |

Tabela 5: Resultados obtidos com procura curvilínea (número de casos resolvidos).

As implementações baseadas nos Critérios de Terminação 1 e 3 são as mais robustas. Comparando as Tabelas 1 e 5, verifica-se que as variantes do método NT baseadas na procura curvilínea resolveram maior ou igual número de casos do que as mesmas variantes baseadas numa procura linear. Dos cinco problemas resolvidos simultaneamente pelos três métodos resultaram os valores acumulados apresentados na Tabela 6, para a procura linear, e na Tabela 7, para a procura curvilínea.

| | <i>gc-PS</i> | | <i>symmlq</i> | | <i>minres</i> | |
|-----|--------------|---------|---------------|---------|---------------|---------|
| | Nº Ext. | Nº Int. | Nº Ext. | Nº Int. | Nº Ext. | Nº Int. |
| C-1 | 98 | 264 | 98 | 274 | 98 | 270 |
| C-2 | 91 | 199 | 86 | 196 | 98 | 214 |
| C-3 | 89 | 234 | 89 | 237 | 89 | 234 |

Tabela 6: Resultados obtidos com procura linear (número de iterações).

| | <i>gc-PS</i> | | <i>symmlq</i> | | <i>minres</i> | |
|-----|--------------|---------|---------------|---------|---------------|---------|
| | Nº Ext. | Nº Int. | Nº Ext. | Nº Int. | Nº Ext. | Nº Int. |
| C-1 | 140 | 348 | 140 | 358 | 140 | 354 |
| C-2 | 144 | 282 | 142 | 280 | 148 | 297 |
| C-3 | 145 | 352 | 145 | 352 | 143 | 348 |

Tabela 7: Resultados obtidos com procura curvilínea (número de iterações).

Verificou-se que, em alguns problemas, as variantes com procura curvilínea convergem para soluções diferentes das obtidas com a procura linear. Tal facto, deve-se ao uso da direcção de curvatura negativa. Analisando as Tabelas 6 e 7, conclui-se que a procura curvilínea exige um maior número de iterações externas e internas do que a procura linear. Separando os resultados por técnica de globalização, apresentam-se na Tabela 8 os resultados acumulados obtidos pela estratégia monótona e na Tabela 9 os obtidos pela estratégia não monótona com estabilização do passo.

| | <i>gc-PS</i> | | <i>symmlq</i> | | <i>minres</i> | |
|-----|--------------|--------|---------------|--------|---------------|--------|
| | NºExt. | NºInt. | NºExt. | NºInt. | NºExt. | NºInt. |
| C-1 | 73 | 180 | 73 | 185 | 73 | 183 |
| C-2 | 78 | 153 | 77 | 152 | 76 | 153 |
| C-3 | 76 | 183 | 76 | 183 | 75 | 181 |

Tabela 8: Resultados baseados numa procura curvilínea (critério monótono).

| | <i>gc-PS</i> | | <i>symmlq</i> | | <i>minres</i> | |
|-----|--------------|--------|---------------|--------|---------------|--------|
| | NºExt. | NºInt. | NºExt. | NºInt. | NºExt. | NºInt. |
| C-1 | 67 | 168 | 67 | 173 | 67 | 171 |
| C-2 | 66 | 129 | 65 | 128 | 72 | 144 |
| C-3 | 69 | 169 | 69 | 169 | 68 | 167 |

Tabela 9: Resultados baseados numa procura curvilínea (critério não monótono com estabilização do passo).

É interessante verificar que a estratégia não monótona com estabilização do passo converge em menos iterações externas do que a estratégia monótona, quando implementadas no âmbito de uma procura curvilínea.

4 Conclusões

Um método de Newton truncado surge quando se resolve o sistema Newton por um método iterativo e se usa um critério de terminação para truncar o processo iterativo e obter uma aproximação à direcção Newton. Neste artigo, foram implementados quatro métodos iterativos baseados em espaços de Krylov e três critérios diferentes de terminação destes processos iterativos. Para a globalização dos algoritmos, foram usados dois critérios de procura unidimensional, um monótono e outro não monótono que inclui uma condição de estabilização do passo. Além disso, a sucessão de aproximações à solução foi ainda gerada através de uma procura linear e de uma procura curvilínea.

A combinação destes diferentes procedimentos gera as diferentes variantes do método de Newton para a resolução de um problema de optimização não linear sem restrições. As experiências computacionais realizadas com base nas variantes apresentadas servem para identificar a combinação mais eficiente e robusta dos procedimentos acima enunciados.

Em termos de conclusões finais, e em relação ao número de iterações externas, os melhores resultados foram obtidos pelas variantes do método NT que se baseiam numa procura linear e que usam o Critério de Terminação 3. A escolha do critério de globalização, entre monótono e não monótono com estabilização do passo, é imediata uma vez que a implementação do critério não monótono traduz-se numa redução do número de chamadas à função, sem aumentar o número de iterações externas. Embora a procura curvilínea tenha resolvido no global um número maior de problemas, o número de iterações externas também aumentou. Um outro aspecto menos positivo da implementação deste tipo de procura reside na necessidade de calcular o menor valor próprio e o correspondente vector próprio [15]

para determinar a direcção de curvatura negativa, quando a matriz dos coeficientes do sistema Newton não é semidefinida positiva. Durante os testes efectuados, poucas vezes houve necessidade de calcular a direcção de curvatura negativa.

Para concluir e com base nos testes realizados, a variante do método de Newton truncado mais eficiente e robusta combina uma procura linear, os métodos symmlq ou minres com o Critério de Terminação 3 e uma estratégia não monótona com estabilização do passo.

Agradecimento

As autoras gostariam de agradecer ao revisor as sugestões enviadas que muito contribuíram para a clarificação dos temas analisados neste artigo.

Referências

- [1] R. S. Dembo e T. Steihaug, *Truncated-Newton Algorithms for Large-Scale Unconstrained Optimization*, Mathematical Programming, Vol. 26, pp. 190-212, 1983.
- [2] J. E. Dennis Jr e R. B. Schnabel, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*, Prentice-Hall Inc., New Jersey, 1983
- [3] E. M. G. P. Fernandes, *Computação Numérica*, 2^a edição, Universidade do Minho, 1998.
- [4] M. C. Ferris, S. Lucidi e M. Roma, *Nonmonotone Curvilinear Line Search Methods for Unconstrained Optimization*, Computational Optimization and Applications, Vol. 6, pp. 117-136, 1996.
- [5] D. Goldfarb, *Curvilinear Path Steplength Algorithms for Minimization which Use Directions of Negative Curvature*, Mathematical Programming, Vol. 18, pp. 31-40, 1980.
- [6] G. H. Golub e C. F. Van Loan, *Matrix Computations*, The Johns Hopkins University Press, 1983.
- [7] N. I. M. Gould, S. Lucidi, M. Roma e P. L. Toint, *Solving the Trust-Region Subproblem Using the Lanczos Method*, SIAM Journal on Optimization, Vol. 9, N^o 2, pp. 504-525, 1999.
- [8] A. Greenbaum, *Iterative Methods for Solving Linear Systems*, SIAM, 1997.
- [9] L. Grippo, F. Lampariello e S. Lucidi, *A Nonmonotone Line Search Technique for Newton's Method*, SIAM Journal on Numerical Analysis, Vol. 23, pp. 707-716, 1986.
- [10] L. Grippo, F. Lampariello e S. Lucidi, *A Class of Nonmonotone Stabilization Methods in Unconstrained Optimization*, Numerische Mathematik, Vol. 59, pp. 779-805, 1991.
- [11] W. Hackbusch, *Iterative Solution of Large Sparse Systems of Equations*, Applied Mathematical Sciences, 95, Springer-Verlag, 1994.

- [12] W. Hock e K. Schittkowski, *Test Examples for Nonlinear Programming Codes*, Springer-Verlag, 1981.
- [13] C. T. Kelley, *Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations*, Frontiers in Applied Mathematics, Vol. 16, SIAM, 1995.
- [14] C. T. Kelley, *Iterative Methods for Optimization*, Frontiers in Applied Mathematics, SIAM, 1999.
- [15] S. Lucidi e M. Roma, *Numerical Experiences with New Truncated Newton Methods in Large Scale Unconstrained Optimization*, Computational Optimization and Applications, Vol. 7. pp 71-87, 1997.
- [16] G. P. McCormick, *A Modification of Armijo's Step-size Rule for Negative Curvature*, Mathematical Programming, Vol. 13, pp. 111-115, 1977.
- [17] J. J. Moré e D. C. Sorensen, *On the Use of Directions of Negative Curvature in a Modified Newton Method*, Mathematical Programming, Vol. 16, pp. 1-20, 1979.
- [18] S. G. Nash e A. Sofer, *Linear and Nonlinear Programming*, McGraw-Hill, 1996.
- [19] J. Nocedal e S. J. Wright, *Numerical Optimization*, Springer Series in Operations Research, 1999
- [20] J. M. Ortega e W. C. Rheinboldt, *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables*, Academic Press Inc., New York, 1970.
- [21] C. C. Paige e M. A. Saunders, *Solution of Sparse Indefinite Systems of Linear Equations*, SIAM Journal on Numerical Analysis, Vol. 12, N° 4, pp. 617-629, 1975.
- [22] A. I. P. N. Pereira, *Estudo e Desempenho do Método de Newton Truncado em Optimização*, Tese de mestrado, Universidade do Minho, 2000.
- [23] K. Schittkowski, *More Test Examples for Nonlinear Programming Codes*, Lectures Notes in Economics and Mathematical Systems, Springer-Verlag, 1987.
- [24] M. A. Wolfe, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization*, Van Nostrand Reinholds Company, 1978.